Естественные науки

**ИЗВЕСТИЯ
ТОМСКОГО ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА им. С.М. КИРОВА**

Том 170 **1969**

ВЛИЯНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ВЕЩЕСТВА НА ПОТЕРИ ЭНЕРГИИ БЫСТРЫМИ ПРОТОНАМИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ГАЛОГЕНИДОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

Э. Т. ШИПАТОВ, Б. А. КОНОНОВ

В работе рассмотрен вопрос о каналировании быстрых протонов в ионных кристаллах, обладающих простой кубической структурой. Рассмотрены случаи прохождения протонов в направлении [100] и между плоскостями (100) монокристаллов. Рассчитаны потенциалы для атомных плоскостей и атомных рядов кристаллов и определены предельные углы каналирования для соединений галогенидов натрия и калия.

Исследованы энергетические спектры протонов, прошедших монокристаллические мишени различных соединений, и найдена корреляция между формой энергетического спектра и соотношением радиусов ионов в соединении, между долей каналирования частиц и порядковым номером галоида в рядах.

The channelling of fast protons in the simple ionic crystals of the cubical structure is considered in this paper.
The penetration of protons along the [100] directions and between the (100) planes of monocrystals is considered.
The Potentials of the atomic planes and the atomic rows of crystals are cab culated and the critical anp-les for channelling for sodium and potassium halo-genides combinations are defined.
The energy spectra of protons having passed through the monocrystals of various compositions are examined and the correlation between the shape of the energy spectrum and the ratio of radii in composition, between the share of particles channelling and the ordinal number of halide in rews is discovered.

В теории прохождения частиц через вещество основным приближением является замена действительной среды, через которую проходит частица, средой изотропной, гомогенной, составленной из отдельных атомов, беспорядочно расположенных по всему объему. Процессы рассеяния частиц на отдельных атомах независимы друг от друга и характеризуются дифференциальным поперечным сечением рассеяния. Торможение частиц в такой аморфной среде не зависит от направления движения частиц и распределение потерь энергии, и угловое распределение частиц зависят только от числа атомов в единице объема или от толщины слоя, пройденного частицей.

Однако в большинстве своем, реальные твердые тела обладают вполне определенной кристаллической структурой, то есть являются представителями другого вида среды – среды гетерогенной, анизотропной и упорядоченной. Развитие радиационной физики в настоящее время остро ставит вопрос о роли кристаллической структуры во всех процессах взаимодействия частиц с веществом.

Первые исследования процессов взаимодействия частиц с монокристаллическими твердыми телами были связаны с катодным распылением веществ и привели к открытию Венером в 1954 году так называемых фокусирующих столкновений атомов [1].

Выполненные в течение последних лет теоретические и экспериментальные исследования прохождения быстрых заряженных частиц через монокристаллические вещества показали, что кристаллическая структура оказывает сильное влияние и на характер движения частиц. При совпадении направлений пуч-

ка частиц и какой-либо главной кристаллографической оси монокристалла наблюдаются аномально низкие потери энергии как у протонов [2–4], так и у тяжелых ионов [5], уменьшаются выходы атомных [6] и ядерных [7–8] процессов, значительно снижается скорость образования радиационных дефектов [9], а также наблюдаются аномалии в рассеянии частиц на монокристаллических мишенях [10]. Все эти явления анизотропии связываются с движением частиц в относительно свободных пространствах решетки – "каналах", образованных совокупностями соседних, параллельных друг другу атомных рядов или атомных плоскостей, лежащих в определенных кристаллографических направлениях.

Захват частиц в каналы осуществляется последовательными скользящими столкновениями частиц с атомами рядов или плоскостей, образующих стенки каналов. Подобное явление получило название "каналирования" частиц в кристаллических решетках.

Следует отметить и другую группу явлений, связанных с влиянием кристаллической структуры на движение частиц, образующихся внутри самих кристаллов в ядерных реакциях [11] или рассеянных на большие углы [12]. Для таких частиц главные кристаллографические направления в отличие от частиц, каналирующих через кристаллы, оказываются закрытыми. Такое явление получило название "блокировки" или "эффекта теней" [13].

Отметим далее, что все исследования эффектов каналирования частиц к настоящему времени проведены в узком кругу простых веществ, таких как: Si, Ge, Au, Cu, обладающих различной кристаллической структурой и при различных энергиях частиц. Поэтому результаты работ трудно систематизировать и невозможно установить связь между изменением свойств кристаллической среды и ее влиянием на движение частиц. С этой точки зрения целесообразно исследовать эффекты каналирования в монокристаллических химических соединениях, обладающих одинаковой кристаллической решеткой, но с различными ее параметрами. Исследование химических соединений тем более интересно, что можно проследить влияние кристаллической структуры в ряду веществ при условии постоянства одной из компонент соединения при изменении других.

Исходя из этих условий, нами в качестве объектов исследования выбраны монокристаллы галогенидов щелочных металлов. NaCl, NaBr, KC1, KBr, KI. Все эти соединения относятся к типу ионных кристаллов и обладают простой кубической решеткой.

Некоторые характеристики данных соединений представлены в табл. 1. Наиболее открытыми направлениями в простой кубической решетке являются направления [100] и [110].

Таблица 1

Характеристики кристаллов \ Соединение	NaCl	NaBr	KCl	KBr	KI
$a \cdot 10^{-8}$ *см*	2,81	2,98	3,14	3,29	3,53
$r_к \cdot 10^{-8}$ *см*	0,98	0,98	1,33	1,33	1,33
$\frac{r_к}{r_а}$	0,54	0,5	0,73	0,68	0,61
q	0,657	0,76	0,55	0,57	0,61
$T_{пл.}$ °K	1077	1028	1049	1013	996
$\Theta_д$ °K	306	243	221	185	155

Здесь
a—постоянная решетки [14],
$r_а$—радиус аниона в соединении [14],
$r_к$—радиус катиона в соединении [14],
q—коэффициент компактности структуры [15]
$T_{пл.}$—температура плавления [16],
$\Theta_д$—характеристическая температура Дебая [17].

На рис. 1 показана структура канала [100] в монокристалле NaCl и схематично показано распределение электронной плотности в плоскости (100).

Можно заметить, что относительно свободное от электронов пространство несимметрично относительно оси канала вследствие различных порядковых номеров ионов, расположенных в узлах решетки.

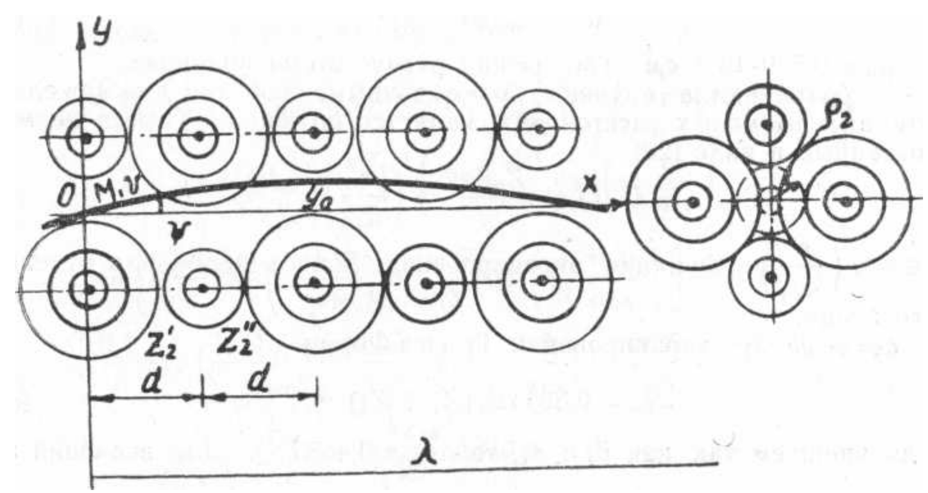


Рис. 1. Структура канала [100] в простой кубической решетке: Ψ — угол влета протона в канал, $У_0$ — амплитуда колебания траектории протонов, R — радиус канала, d — расстояние между соседними ионами в ряду, λ — длина волны колебания траектории протонов, Z_2' и Z_2'' — порядковые номера ионов

Механизм каналирования

Анализ движения частиц по каналам решетки в классическом приближении, справедливом для протонов [18], показывает, что когда частица влетает в кристалл под достаточно малым углом к оси канала, она в течение относительно длительного времени будет двигаться по осциллирующей траектории с амплитудой $У_0$ в некотором среднем потенциальном поле $V(\rho)$, обусловленном всеми атомами в ряду или плоскости. При этом удобно рассматривать только поперечное движение частицы с энергией $E\perp = E\Psi^2$, где E – энергия частицы и Ψ – угол между направлением оси канала и направлением пучка частиц.

Потенциалы атомных рядов и атомных плоскостей легко получить, зная потенциалы взаимодействия частицы $U(r)$ с отдельными атомами.

Известно, что при рассеянии протонов, с энергиями в интервале от 1 кэв до 10 Мэв на малые углы особенно важным становится учет экранирования ядер атомными электронами.

Бор [19] для учета экранирования ввел потенциал взаимодействия между частицей и атомом вида:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{a_Б}\right). \tag{1}$$

Здесь и далее применяем следующие обозначения: Z_1e – заряд протона, Z_2e – заряд рассеивающего атома, r – расстояние от центра атома до налетающей частицы, $a_Б$ – радиус экранирования.

$$a_Б = a_0\,(Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}})^{-\frac{1}{2}}, \tag{2}$$

где a_0 – боровский радиус атома водорода.

В большинстве случаев более точным, особенно для тяжелых атомов и на малых расстояниях, является потенциал Томаса-Ферми, записанный в виде [20]:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}\,\chi\left(\frac{r}{a_{ТФ}}\right). \tag{3}$$

Здесь $\chi\left(\frac{r}{a_{ТФ}}\right)$ – функция экранирования Томаса-Ферми для отдельного атома; $a_{ТФ}$ – радиус экранирования Томаса-Ферми.

$$a_{ТФ} = 0{,}8853\,a_0\,(Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}})^{-\frac{1}{2}}. \tag{4}$$

В дальнейшем так как $Z_1<Z_2$, то $a_{ТФ} = 0{,}468\,Z_2^{-\frac{1}{3}}$. Для значений r, сравнимых с радиусом экранирования, функцию $\chi\left(\frac{r}{a_{ТФ}}\right)$ – можно аппроксимировать выражением

$$\chi\left(\frac{r}{a_{ТФ}}\right) \sim \frac{a_{ТФ}}{2r} \quad (5)$$

и потенциал запишется в виде

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2 a_{ТФ}}{2r^2}. \quad (6)$$

Для больших значений r, а именно для $0 \le r \le 6a_{ТФ}$ более точным является потенциал, полученный Мольер [21]

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}\left[0{,}1\exp\left(-\frac{6r}{a_{ТФ}}\right) + 0{,}55\exp\left(-\frac{1{,}2}{a_{ТФ}}\right) + 0{,}35\exp\left(-\frac{0{,}3r}{a_{ТФ}}\right)\right]. \quad (7)$$

Нами были получены выражения для потенциалов атомных рядов и атомных плоскостей в монокристаллах двухкомпонентных химических соединений, составленных из ионов с различными порядковыми номерами Z_2 и Z'_2.

Для атомных рядов потенциалы Бора (1), Мольер (7) и Нильсена (6) имеют вид:

$$\overline{V}(\rho) = \frac{Z_1 e^2}{a}\left[Z'_2 K_0\left(\frac{\rho}{a'_Б}\right) + Z''_2 K_0\left(\frac{\rho}{a''_В}\right)\right]. \quad (8)$$

$$\overline{V}(\rho) = \frac{Z_1 e^2}{a}\left\{Z'_2\left[0{,}1K_0\left(\frac{6\rho}{a'_{ТФ}}\right) + 0{,}55K_0\left(\frac{1{,}2\rho}{a'_{ТФ}}\right) + 0{,}35K_0\left(\frac{0{,}3\rho}{a'_{ТФ}}\right)\right] + Z'_2\left[0{,}1K_0\left(\frac{6\rho}{a''_{ТФ}}\right) + 0{,}55K_0\left(\frac{0{,}3\rho}{a''_{ТФ}}\right) + 0{,}35K_0\left(\frac{0{,}3\rho}{a''_{ТФ}}\right)\right]\right\}. \quad (9)$$

$$\overline{V}(\rho) = \frac{\pi Z_1 e^2}{4\rho \cdot a}\left[Z'_2 a'_{ТФ} + Z''_2 a''_{ТФ}\right]. \quad (10)$$

Здесь $K_0(z)$ – функция Макдональда [22], ρ – расстояние по радиусу от центра атомного ряда.

Для атомных плоскостей для потенциалов Бора, Мольер и Нильсена получены следующие выражения:

$$\overline{V}(\rho)_{пл.} = \frac{\pi \cdot Z_1 e^2}{a^2}\left[Z'_2 a'_Б \exp\left(-\frac{\rho}{a^I_Б}\right) + Z''_2 a''_Б \exp\left(-\rho/a''_Б\right)\right]. \quad (11)$$

$$\overline{V}(\rho)_{пл} = \frac{\pi Z_1 e^2}{a^2}\left\{Z'_2 a'_{ТФ}\frac{0{,}1}{6}\exp\left(-\frac{6\rho}{a'_{ТФ}}\right) + \right. \quad (12)$$

$$+\left[\frac{0{,}55}{1{,}2}\exp\left(-\frac{1{,}2\rho}{a'_{ТФ}}\right) + \frac{0.35}{0{,}3}\exp\left(-\frac{0{,}3\rho}{a'_{ТФ}}\right)\right] + Z''_2 a''_{ТФ} \times$$

$$\left.\times\left[\frac{0{,}1}{6}\exp\left(-\frac{6\rho}{a''_{ТФ}}\right) + \frac{0{,}55}{1{,}2}\exp\left(-\frac{1{,}2\rho}{a''_{ТФ}}\right) + \frac{0{,}35}{0{,}3}\exp\left(-\frac{0{,}3\rho}{a''_{ТФ}}\right)\right]\right\} \quad (13)$$

$$\overline{V}(\rho)_{пл} \simeq \frac{\pi Z_1 e^2}{2a^2}\left[Z'_2 a'_{ТФ} + Z'_2 a''_{ТФ}\right].$$

Рассчитанные зависимости потенциалов $\overline{V}(r_{min})$ для атомных рядов [100] и атомных плоскостей (100) в KBr представлены на рис. 2 и 3.

Сравним потенциалы рядов и плоскостей между собой. На рисунках видно, что потенциалы рядов и плоскостей малы до некоторых значении $\rho = a_{ТФ}$, а затем наблюдается их резкое возрастание. Следует отметить, что потенциалы рядов уменьшаются быстрее с расстоянием, чем потенциалы плоскостей; оба потенциала становятся равными на расстоянии $\sim\frac{d}{2}$, отсюда эффекты ряда должны быть более чувствительными к нарушениям решетки. Движение в межплоскостном пространстве, кроме того, является двухмерным. Отметим, что потенциалы рядов зависят только от заряда на единицу ряда $\frac{Z_2 e}{d}$ и не зависят от энергии. Таким образом, каналы, расположенные вдоль главных кристаллографических направлений, имеют не только большие размеры поперечного сечения, но и являются более эффективными с точки зрения влияния на характер движения частиц.

В рядах рассматриваемых соединений величины потенциалов возрастают с увеличением порядковых номеров.

Приближение непрерывных рядов справедливо на расстояниях ρ, больших, чем радиус экранирования атомов.

Для того, чтобы это приближение было справедливым, необходимо потребовать, чтобы рассеяние частицы рядом определялось одновременно многими атомами в ряду. Это условие, очевидно, лучше выполняется при больших энергиях частиц. Можно показать, что каналирование становится возможным, если угол влета частицы в канал Ψ меньше некоторого предельного угла Ψ_{Max} [23]

$$\Psi < \Psi_{\max} = \sqrt{\frac{2b}{d}}, \tag{14}$$

где $b = \dfrac{Z_1 Z_2 e^2}{E}$ – диаметр столкновения в лабораторной системе координат.

Величину предельного угла каналирования можно найти, если известно минимальное расстояние подхода частицы к ряду, при котором непрерывное описание рядов и плоскостей еще выполняется. Согласно Линдхарду [23] для устойчивого каналирования $\rho_{\min} \cong a_{ТФ}$. С другой стороны, если траектория частицы лежит в плоскости атомного ряда, минимальное расстояние можно найти из решения уравнения

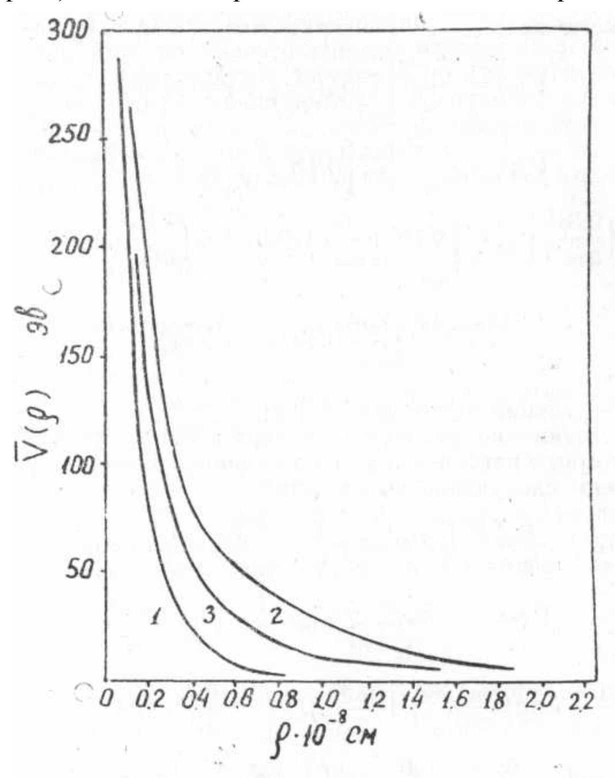


Рис. 2. Средние потенциалы $V(\rho)$ для рядов [100] в KBr. Здесь и на следующем рисунке приняты следующие обозначения:
1 — потенциал Бора,
2 — потенциал Нельсона
3 — потенциал Мольер

$$\overline{V}(\rho) = E\Psi^2. \tag{15}$$

Отсюда

$$\Psi = \left[\frac{\overline{V}(\rho)}{E}\right]^{\frac{1}{2}}. \tag{16}$$

Если теперь найти значение потенциала $\overline{V}(r_{\min})$, то можно получить значение максимального угла каналирования при данной энергии частиц.

Частицы, движущиеся по каналам решетки в среднем поле $\overline{V}(r)$ с поперечной энергией $E\Psi^2$, подходя к рядам или плоскостям на расстояние min, встречают как бы потенциальный барьер. При высоких скоростях частиц потенциальные барьеры по порядку величины равны:

для рядов
$$\sim \frac{4Z_1 Z_2 e^2}{d} \approx Z_1 Z_2 \cdot 20 \text{ эв} \tag{17}$$

при d~$5a_0$;

для плоскостей $$\sim 5Z_1Z_2e^2 \cdot N \cdot d_{\text{п}} a_{\text{ТФ}} \approx 5Z_1Z_2^{2/3}\ \text{эв}, \qquad (18)$$

где $d_п$ – расстояние между плоскостями, $Nd_п$ – среднее число атомов на единицу площади плоскости.

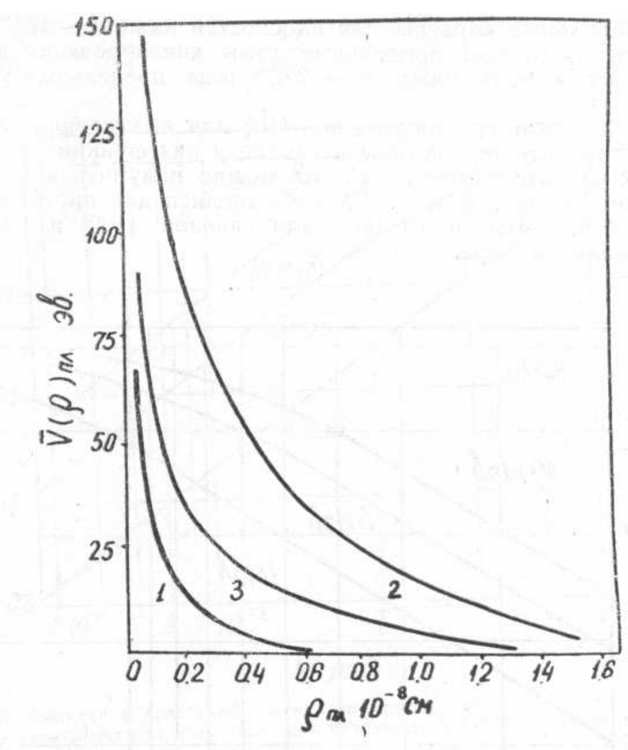


Рис. 3. Средние потенциалы V (ρ) пл для плоскостей (100) в КВr.

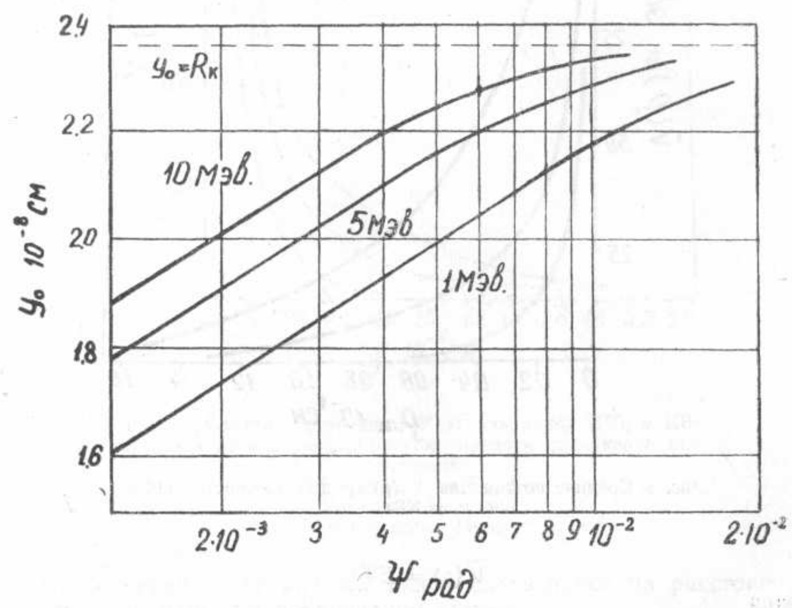


Рис. 4. Амплитуда колебаний траектории протона в канале [100] КВr в зависимости от угла влета протона в канал при различных значениях энергии протонов

Потенциальные барьеры для плоскостей ниже $b \sim 4Z_2^{\frac{1}{3}}$ раз барьеров рядов и отсюда предельные углы каналирования для плоскостей должны быть ниже в $\sim 2Z_2^{\frac{1}{6}}$ раза предельных углов для рядов.

Если использовать выражение (16) для вычисления амплитуды колебания траектории частицы в канале y как функции угла Ψ при различных энергиях частиц E, то можно получить кривые, представленные на рис. 4 и 5. Расчет выполнен для протонов с энергиями 1 Мэв, 5 Мэв и 10 Мэв для каналов [100] и [100] в KBr и для потенциала Бора.

Из рисунков видно, что для различных энергий кривые расположены близко друг к другу и, следовательно, амплитуды y слабо зависят от угла Ψ. Сближение кривых по мере приближения амплитуды к значению радиуса канала $R_к$ и их насыщение обусловлено резким возрастанием потенциалов, начиная со значений

$$\rho_{min} = R_к - y_0 \approx a_{ТФ}. \tag{19}$$

Принимая это значение для ρ_{min}, можно найти предельные углы каналирования протонов в монокристаллах. В случае KBr для протонов с энергией 6,72 Мэв углы для каналирования вдоль [100] направления и между плоскостями (100) равны

$$\Psi_{max[100]} \cong 0{,}49°, \quad \Psi_{max(100)} \cong 0{,}17°. \tag{20}$$

Время одного колебания траектории частицы приблизительно равно [18]

$$\frac{4y}{\Psi v}, \tag{21}$$

и, следовательно, длина волны траектории λ равна

$$\lambda \cong \frac{4y}{\Psi}. \tag{22}$$

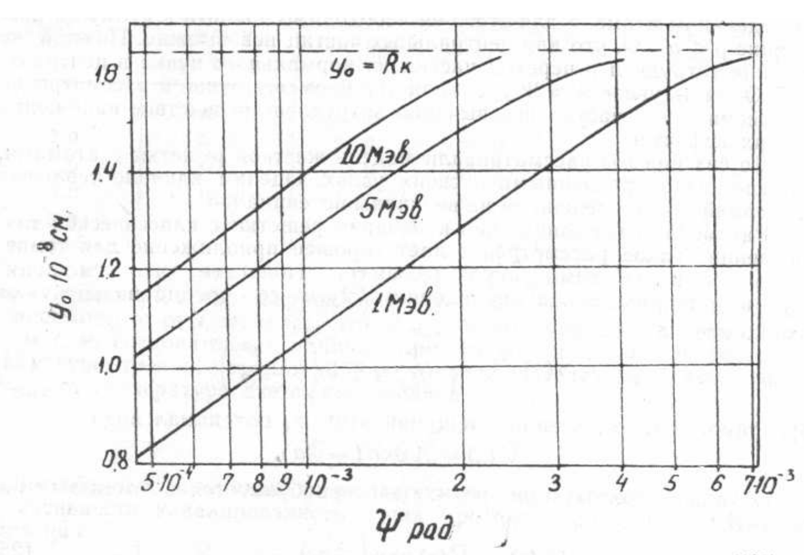


Рис. 5. Амплитуда колебаний траектории протона между плоскостями (100) KBr в зависимости от угла влета при различных значениях энергии протонов

Соотношение между y и Ψ, представленное на рис. 4 и 5, говорит о том, что λ уменьшается с ростом Ψ, что и следовало ожидать. Из рис. 4 и 5 можно найти, что для протонов с энергией 6,72 Мэв для монокристалла KBr

$$\lambda_{[100]} \cong 2 \cdot 10^{-5}\ см, \quad \lambda_{(100)} \cong 3{,}9 \cdot 10^{-5}\ см. \tag{23}$$

Соотношение между амплитудой y и углом Ψ в ряду соединений позволяет сделать вывод о том, что при увеличении порядковых номеров компонент величина длины волны незначительно возрастает.

Теперь качественно рассмотрим поведение пучка частиц, проходящих через решетку кристаллов. При углах падения частиц на кристалл относительно главных направлений или плоскостей, меньших предельного угла $\Psi<\Psi_{Max}$, частицы захватываются в каналы решетки. Подход их к атомным рядам на расстояние, меньшее радиуса экранирования, затруднен, и угловое распределение таких частиц будет отличным от углового распределения частиц в аморфной среде. Такой пучок получал название центрального пучка частиц. Если $\Psi>\Psi_{мах}$, то частицы, проходя через решетку, испытывают обычное рассеяние на отдельных атомах и в большинстве случаев их движение аналогично движению частиц в аморфной среде. Такой пучок называют нормальным или хаотическим. Интересно отметить, что эти два пучка не связаны между собой

и переход частиц из одного пучка в другой в совершенном кристалле невозможен. Действительно, чтобы частица могла из центрального пучка перейти в хаотический, ей необходимо испытать очень сильное рассеяние на отдельном атоме, а для этого ей необходимо подойти к атому на рас стояние $\rho < a_{ТФ}$, что для центральных частиц невозможно. По этой же причине затруднен и переход частиц из нормального пучка в центральный. Область углов $\Psi \approx \Psi_{мах}$ является промежуточной и рассмотрение поведения таких частиц чрезвычайно затруднено вследствие наложения многих эффектов.

До сих пор мы рассматривали модель жесткой решетки с атомами, неподвижно закрепленными в своих узлах. Оценим влияние тепловых колебаний атомов решением на величины потенциалов.

Рассмотрим гармонические колебания решетки с классической точки зрения. Такое рассмотрение дает хорошее приближение для температур больших температур Дебая $\Theta_д$. Полагаем, что смещения атомов подчиняются распределению Гаусса со среднеквадратичным смещением $\overline{s^2}$.

$$\omega(s)\,ds = \frac{1}{\sqrt{2\pi \overline{s^{2}}}} \exp\left(-\frac{s^2}{2\overline{s^2}}\right). \qquad (24)$$

При таком распределении смещении атомов, потенциал вида

$$\overline{V}(\rho) = A\exp(-\rho/a),$$

где A и a – постоянные величины, преобразуется в потенциал вида [24]

$$\overline{V'}(\rho) = \overline{V}(\rho)\exp\left(\frac{\overline{s_\perp^2}}{2a^2}\right), \qquad (25)$$

где $s_\perp^2$ – среднеквадратичное смещение в направлении перпендикулярном траектории частицы в канале. Согласно динамической теории кристаллических решеток для отклонения атома от своего положения равновесия можно записать [25].

$$\overline{s_\perp^2} = \frac{0{,}5}{T_{пл}}\cdot 10^{-2}\begin{cases} T & \text{при } T \geqslant \Theta_Д \\ \dfrac{\Theta_Д}{4} & \text{при } T < \Theta_Д. \end{cases} \qquad (26)$$

Это выражение справедливо только для простых кубических решеток, где выполняется условие $s_\perp^2 = \frac{1}{3}\overline{s^2}$.

Чтобы оценить влияние тепловых колебаний на величину $V(\rho)$, рассмотрим изменение потенциала в монокристалле KCl с изменением температуры T. Для оценки используем потенциал Мольер (14) для атомной плоскости (100). Результаты расчета приведем в табл. 2.

Таблица 2

Потенциал Мольер для атомных плоскостей (100) в монокристалле KCl с учетом тепловых колебаний ионов

$\rho/Q_{ТФ}$	$\overline{V}(\rho)_{пл}$ эв	$V'(\rho)_{пл}$ с учетом тепловых колебаний			
		T=0°K	T=300°K	T=700°K	T=1049°K
1,0	29,7	30,6	31,6	31,2	36,8
2,0	20,2	20,9	21,41	23,2	25,0
3,0	14,4	14,9	15,3	16,51	17,7
4,0	10,52	10,7	11,2	12,1	13,1
5,0	7,73	7,96	8,21	8,9	9,6

Можно заметить, что тепловые колебания атомов приводят к незначительному росту потенциала, и этот рост вызывает соответственное и еще более слабое увеличение угла $\Psi_{мах}$. С другой стороны, тепловые колебания атомов приводят к уменьшению размеров канала $R_к$ на величину средней амплитуды колебания $S^\perp$. Теперь для устойчивого каналирования расстояние ближнего подхода к стенке канала ρ_{min} будет определяться выражением [26].

$$\rho_{min} \geq cs_\perp, \qquad (27)$$

где c – малая постоянная величина. Из простых соображений следует ожидать, что с будет являться функцией длины каналированной траектории протона t, которая приблизительно равна толщине монокристалла. Зависимость c от t означает, что Ψ_{max} будет уменьшаться с увеличением t, и, следовательно, влияние температуры для толстых образцов более существенно, чем для тонких. Можно показать, что зависимость Ψ_{max} от температуры дается выражением

$$\Psi_{max} \backsim T^{-\frac{1}{2}}. \qquad (28)$$

Таким образом, повышение температуры образца приведет к снижению интенсивности каналированного пучка протонов при данной толщине образца.

Потери энергии протонов в монокристаллах соединений

У тяжелых заряженных частиц при прохождении их через вещество энергия теряется в двух процессах: в неупругих столкновениях с атомными электронами (электронное торможение) и в упругих столкновениях с ядрами атомов (ядерное торможение). При высоких энергиях частиц электронное торможение преобладает и энергия частиц тратится на возбуждение или вырывание электронов в атомах. В хаотической системе ядерное торможение преобладает над электронным при $s<10$, где s – безразмерная величина, характеризующая энергию, введенная Томасом-Ферми.

$$\varepsilon = \frac{Q_{\text{тф}} \cdot E}{Z_1 Z_2 e^2} \cdot \frac{M_2}{M_1 + M_2}, \qquad (29)$$

где M_1 – масса налетающей частицы (в нашем случае – протона), M_2 – масса ядра атома среды.

Так как нас интересует прохождение быстрых протонов через вещество, где ядерное торможение незначительно и составляет лишь ~ 0,1% от общих потерь энергии, то остановимся на ионизационных потерях энергии частиц.

При рассмотрении потерь энергии удобно выделить потери энергии на близкие столкновения с большой передачей импульса электронам и далекие – с малой передачей импульса электронам. Такое деление обусловлено тем, что в близких столкновениях необходимо учитывать квантовомеханические явления, в то время как в далеких столкновениях они не играют роли в определении потерь энергии. Такое разделение удобно еще и тем, что каналированные частицы движутся в областях, где электронная плотность значительно ниже средней и, следовательно, роль близких столкновений в каналах невелика, в то время как далекие столкновения мало чувствительны к структуре вещества.

При больших энергиях и малых атомных номерах Z_1 частиц для расчета средних потерь энергии справедлива формула Бете-Блоха, имеющая вид [23]

$$\frac{dE}{dx} = S_{\text{эл.}} \cdot N \cdot Z_2 = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} \cdot N \cdot B. \qquad (30)$$

Здесь N – число атомов в единице объема, $S_{\text{эл}}$ – поперечное сечение электронного торможения для аморфного вещества, B – коэффициент торможения. $B = Z_2 \ln \frac{2mv^2}{I} \bar{I}(z)$ – средний потенциал ионизации атома с атомным номером z.

Для сложных соединений величину $\bar{I}$ находим по правилу Брэгга [27].

$$\ln \bar{I} = \frac{\sum_i N_i Z_i \ln I_i}{\sum_i N_i Z_i}, \qquad (31)$$

где N_i число атомов в единице объема с атомным номером Z_i, I_t средний потенциал ионизации атомов элемента.

Таблица 3

Массовая тормозная способность соединений

Соединение	I, эв	Число электронов в $см^3$ $NZ_2 \cdot 10^{23}$	$\frac{1}{\rho}\left(\frac{dE}{dx}\right) \frac{мэв}{2\,см^2}$
NaCl	189	6,248	42,9
NaBr	316	8,647	34,185
KCl	219	5,790	40,12
KBr	345	7,580	34,32
KI	479	8,179	29,86

Нами вычислены потери энергии протонов с энергией 6,72 Мэв во всех исследуемых веществах с учетом поправок на эффект связи K-электронов (табл. 3). Поправками на эффект плотности среды и на эффект связи L-электронов в атомах при данной энергии протонов можно пренебречь [20]. Бете [28] при выводе формулы (31) для случая электронного газа установил, что при высоких скоростях частиц потери энергии на электронные столкновения асимптотически складываются из равных долей от далеких и близких столкновений. Недавно Линдхард [29] подтвердил это правило для случая атомных систем. Исходя из этих замечаний, удобно разделить потери энергии на далекие и близкие [23].

$$\frac{dE}{dx}(r) = S_{эл}\left[\alpha N \cdot Z_2 + (1-\alpha)\rho(\vec{r})\right], \tag{32}$$

где $\rho(r)$ – плотность электронов в некоторой точке пространства, через которое проходит частица. Второй член в выражении определяет потери энергии в близких столкновениях с электронами. Коэффициент $\alpha \leq 1/2$ и при увеличении энергии приближается к значению 1/2. Это выражение показывает, что для быстрых частиц, проходящих по каналам решетки, потери энергии должны уменьшаться в два раза, поскольку вероятность близких столкновений для центрального пучка незначительна. Потери почти полностью будут определяться далекими столкновениями частиц с электронами среды. Так как далекие столкновения не чувствительны к точному расположению траектории протона в канале, то изменение температуры T не должно заметно влиять на потери энергии протонов в монокристаллах.

Можно ввести эффективный атомный номер $Z_2(E_\perp)$, который определяет число электронов на атом, находящихся на расстояниях больших ρ_{min} от ряда, когда

$$\overline{V}(\rho_{min}) = E_\perp.$$

Тогда поперечное сечение электронного торможения можно переписать в виде [23]

$$\hat{S}_{эл}(E_\perp) = \hat{S}_{эл}\left[(1-\alpha) + \alpha\frac{\hat{Z}_2(E_\perp)}{Z_2}\right]. \tag{33}$$

Можно показать, что отношение $\frac{Z_2^*(E_\perp)}{Z_2}$ дается выражением

$$\frac{Z_2^*(E_1)}{Z_2} = \frac{d \cdot \rho_{min}\,\overline{V}'(\rho_{min})}{2Z_1 Z_2 e^2} \tag{34}$$

и приблизительно равно $\frac{\gamma E_\perp}{E\Psi_{max}^2}$, если потенциал изменяется как $\rho^{-\gamma}$.

Потери энергии являются статистическим процессом и поэтому формула (31) определяет лишь средние потери энергии на единицу пути. Для тяжелых заряженных частиц при прохождении ими достаточных толщин функция распределения потерь энергии около среднего значения имеет формулу распределения Гаусса. Флуктуации потерь энергии на единице пробега частицы обусловлены только близкими столкновениями и, следовательно, мы вправе заменить среднюю плотность электронов Z_2N на $\rho(r)$.

Тогда

$$\left[\frac{d(\Delta E)^2}{dx}\right]_{эл} = 4\pi Z_1^2 e^4 \rho(\vec{r}) \tag{35}$$

или, используя эффективный атомный номер,

$$\left[\frac{d(\Delta E)^2}{dx}\right]_{эл} = 4\pi Z_1^2 e^4 Z_2^*(E_\perp). \tag{36}$$

Таким образом, полуширина аномального пика должна быть уже, чем нормального.

Отметим, что при $\Psi \approx \Psi_{max}$ по физическим соображениям должны наблюдаться потери энергии выше, чем у нормального пучка частиц вследствие блокировки на атомных рядах или плоскостях. Если угловое распределение каналированных частиц должно иметь максимум при $\Psi=0$ и затем быстро уменьшаться с ростом угла, то угловое распределение блокированных частиц должно иметь максимум при углах $\Psi \approx \Psi_{max}$. Такое поведение частиц наблюдали в монокристалле Si [4].

Экспериментальные результаты

Эксперименты по исследованию потерь энергии и каналированию протонов в монокристаллах галогенидов щелочных металлов нами проведены на экспериментальной установке, схема которой приведена на рис. 6. Протоны 1 из циклотрона Томского политехнического института проходят в камеру рассеяния, где падают на тонкую платиновую мишень 2 толщиной около 3 *мг/см*^{2}, установленную в центре камеры. Пучок протонов, рассеянный под углом 30° от мишени, коллимировался тонкими танталовыми диафрагмами и проходил в камеру гониометра, где помещался исследуемый монокристаллический образец 3. Диаметр пятна на образце 2 мм, энергия пучка протонов 6,72 Мэв, и угловая расходимость пучка меньше ±0,1°.

Тонкие монокристаллические образцы различных соединений с толщинами от 15 *мг/см*^{2} до 50 *мг/см*^{2}, предварительно ориентированные осью [100] по направлению пучка, укреплены на поворотном устройстве гониометра, имеющем регулировку в горизонтальной и вертикальной плоскостях с точностью установки углов ±0,05 и ±0,1 градуса соответственно. Энергию протонов после прохождения образцов опре-

деляли сцинтилляционным спектрометром 4. Энергетическое разрешение спектрометра для протонов с энергией 6,72 Мэв составляет 2,8%.

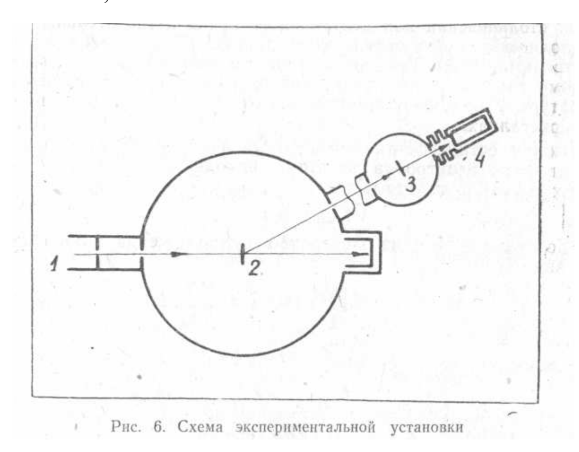


Рис. 6. Схема экспериментальной установки

Энергетическое распределение протонов, прошедших монокристаллические образцы NaCl толщиной 17,3 *мг/см*^{2} и KBr толщиной 41,2 *мг/см*^{2}, представлено на рис. 7 и 8. В правой части рисунков приведен энергетический спектр протонов, падающих на образцы.

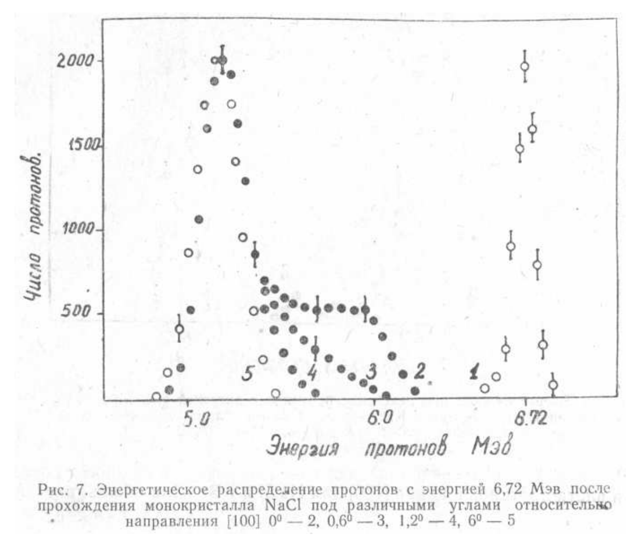


Рис. 7. Энергетическое распределение протонов с энергией 6,72 Мэв после прохождения монокристалла NaCl под различными углами относительно направления [100] 0° — 2, 0,6° — 3, 1,2° — 4, 6° — 5

Образцы поворачивали в горизонтальной плоскости вокруг оси [001] так, что пучок протонов оставался параллельным плоскостям (010). Кривые 2, 3, 4, 5 представляют энергетические спектры протонов при углах поворота 0; 0,6; 1,2 и 6 градусов соответственно. Все спектры нормированы к одному максимальному значению. Незначительный сдвиг спектров в сторону меньших значений энергии и их уширение обусловлены увеличением толщины образца при его повороте.

Таблица 4

Потери энергии протонов в монокристаллах соединений

Соединение	Угол поворота в градусах	Толщина образца *мг/см*^{2}	$\Delta E_{теор.}$ *кэв*	$\Delta E_{норм. эксп.}$ *кэв*	$\Delta E_{эксп.}$ *кэв*	$\frac{N_{кан.}}{N_{норм.}}$
NaCl	0	17,3	742	760±40	650±40	0,28
	0,6	~17,3	~742	760±40	710±40	0,14
	1,2	~17,3	~742	760±40	740±40	0,04
	6	~17,31	~743	770±40	770±40	~0,0
KBr	0	41,2	1410	1420±60	1250±60	0,36
	0,6	~41,2	~1410	1420±60	1320±60	0,266
	1,2	~41,2	~1410	1420±60	1380±60	0,11
	6	~41,24	~1411	1440±60	1440±60	~0,0

Из рисунков видно, что протоны, падающие на монокристаллы в направлении, достаточно далеком от направления [100], имеют энергетическое распределение, ожидаемое для поликристаллических и аморфных веществ. Когда направление [100] монокристаллов совпадает с направлением пучка, спектр искажается, и на высокоэнергетичной части спектра появляется "хвост"; указывающий на то, что некоторая до-

ля частиц теряет меньшую энергию, чем частицы в нормальном спектре. При увеличении угла поворота "хвост" постепенно исчезает. Число частиц в центральном пучке можно определить простым вычитанием нормального спектра из нормированного.

В табл. 4 приведены средние потери энергии протонов в NaCl и KBr, вычисленные по формуле Бете-Блоха и найденные экспериментально, а также значение коэффициента анизотропии, представляющего собой отношение числа частиц в аномальной части спектра к общему числу частиц в спектре.

Можно отметить, что большая часть протонов находится в нормальном пучке и ее энергетические потери довольно хорошо согласуются с расчетными. Средние потери энергии пучка протонов, найденные из энергетических спектров, оказываются несколько ниже за счет той доли частиц, которые каналируют через кристаллы. Доля частиц в каналированном пучке при нулевом угле равна 0,36 для KBr и 0,28 для NaCl. При увеличении угла поворота кристалла доля каналированных частиц уменьшается и средние потери протонов все более приближаются к расчетным.

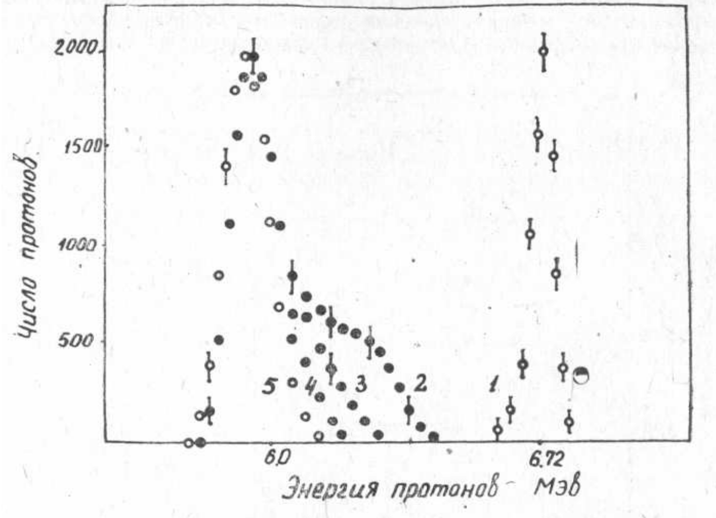


Рис. 8. Энергетическое распределение протонов с энергией 6,72 Мэв после прохождения монокристалла KBr под различными углами относительно направления [100] 0°—2, 0,6°—3, 1,2°—4, 6°—5

На рис. 9 представлена зависимость коэффициента анизотропии от угла влета протонов в канал [100] для NaCl и KBr. Для обоих кристаллов ход кривых аналогичен.

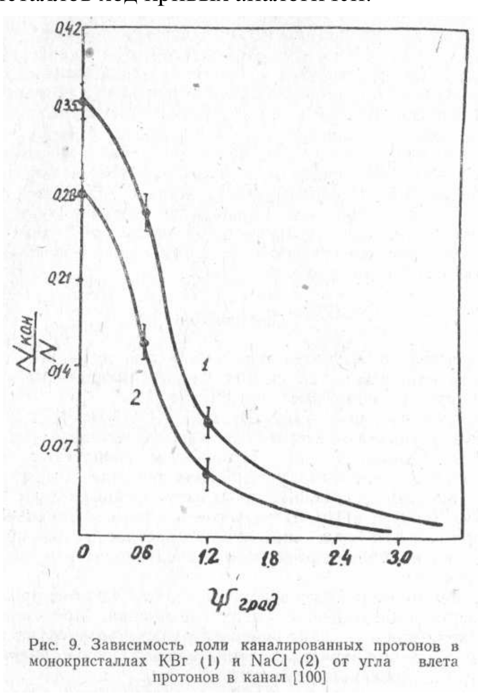


Рис. 9. Зависимость доли каналированных протонов в монокристаллах KBr (1) и NaCl (2) от угла влета протонов в канал [100]

Угловые полуширины кривых для NaCl и KBr равны ~0,68° и 0,8° соответственно. Согласно теоретическим оценкам (20) полуширины кривых должны составлять величины ~ 0,25° для KBr и ~ 0,02° для

NaCl. Тот факт, что "хвосты" исчезают значительно медленнее, чем предсказывает теория, подтверждает вывод о том, что при высоких энергиях протонов ориентационные эффекты обусловлены главным образом атомными плоскостями, а не атомными рядами монокристаллов.

Ниже обсудим некоторые факторы, которые могут повлиять на изменение формы спектров. Поскольку потери энергии протонов существенно определяются распределением электронной плотности в пространстве между плоскостями (010) или в направлении [100], мы вправе полагать, что изменения в распределении электронной плотности в ряду соединений от NaCl до NaI и от KC1 до KI приведет и к изменению формы энергетического спектра. Для наглядности обратимся к рис. 1. Мы уже отмечали, что пространство, свободное от электронов, в ионных кристаллах несимметрично относительно оси [100], что обусловлено различием в порядковых номерах ионов в узлах решетки. Несимметрия распределения электронной плотности возрастает в рядах галогенидов натрия и калия с ростом порядковых номеров галоидов. По мере движения частицы вдоль направления [100] картина распределения электронной плотности будет поворачиваться на угол 90° при переходе от одного атомного слоя к другому за счет перемены ионов в узлах решетки. Становится очевидным, что все пространство, заключенное между атомными рядами [100], удобно разбить на три части.

Частица, траекторию которой можно заключить в цилиндр с осью вдоль [100] направления и с радиусом основания ρ_2 движется в области, где теряет энергию преимущественно на далекие столкновения с атомными электронами. Потери энергии у таких частиц составляют приближенно половину потерь энергии нормального пучка частиц. При больших углах траектория частицы может оказаться в области, ограниченной цилиндром с радиусом ρ_2, где кроме далеких столкновений в потерях энергий начинают играть роль и близкие столкновения с электронами, принадлежащими отрицательно заряженным ионам с большими порядковыми номерами. Потери энергии у таких частиц несколько больше, чем потери энергии у первой группы частиц, но меньше, чем у частиц в нормальном пучке. И, наконец, при углах влета в кристалл $\Psi>\Psi_{max}$ мы имеем дело с нормальным пучком частиц. Соотношение между этими тремя областями в межионном пространстве и определяет форму энергетического спектра протонов. Большая несимметричность в распределении электронной плотности в монокристалле NaCl, чем в монокристалле KBr, и объясняет тот факт, что аномальная часть спектра в случае KBr выражена отчетливее в случае NaCl.

Заключение

1. Рассмотрено влияние кристаллической структуры соединений галогенидов щелочных металлов, обладающих простой кубической структурой на прохождение быстрых протонов.
2. Для соединений NaCl, NaBr, NaI, KC1, KBr, KI найдены потенциалы атомных рядов и атомных плоскостей. С увеличением порядкового номера галоида в ряду потенциалы возрастают.
3. Найдены предельные углы каналирования быстрых протонов в ионных кристаллах вдоль главных направлений [100] и [110] и между плоскостями (100) и (110). В ряду соединений с увеличением порядкового номера галоида предельный угол возрастает. Захват протонов в каналы решетки наиболее эффективен в соединениях с большими порядковыми номерами.
4. Экспериментально исследованы потери энергии протонов с первичной энергией 6,72 Мэв в рядах соединений. При совпадении оси [100] монокристаллов с направлением пучка протонов часть протонов каналирует через монокристалл, теряя вдвое меньшую энергию по сравнению с неканалированным пучком.
5. Доля каналированных протонов возрастает в ряду соединений с увеличением порядкового номера галоида, что подтверждает теоретические оценки.
6. Сделан вывод об определяющем влиянии на каналирование быстрых протонов атомных плоскостей кристаллов.
7. Каналирование в рядах галогенидов натрия и калия наиболее выражено в монокристаллах NaCl и KC1 и уменьшается в рядах соединений при увеличении порядкового номера галоида с изменением соотношения между радиусами ионов в соединении.

ЛИТЕРАТУРА

1. Р. Н. Гарбер, А. И. Федоренко. УФН, т. 83, № 3, 385 (1964).
2. C. Erginsoy, H. E. Wegner, W. M. Gibson. Phys. Rev. Letters, 13, № 17, 530 (1964).
3. G. Dearnaley. IEEE, Trans. Nucl. Sci., 11, 249 (1964).
4. W. M. Gibson, C. Erginsoy, H. E. Wegner, B. R. Appletton. Phys. Rev. Letters, 15, № 8, 357 (1965).
5. S. Datz, T. S. Noggle, C. D. Moak. Phys. Rev. Letters, 15, 254 (1964).
6. W. Brandt, I. M. Khan, D. L. Potter, R. D. Wor1y, H. P. Smith. Phys. Rev. Letters, 14, №2, 42 (1965).
7. E. Bogh, I. A. Davies, H. L. Nielson. Phys. Letters, 12, № 2, 129 (1964).

8. M. W. Thompson. Phys. Rev. Letters, 13, 256 (1964).
9. O. S. Oen, T. S. Noggle. Phys. Rev. Letters, 16, № 10, 395 (1966).
10. W. M. Gibson. IEEE, Trans. Nucl. Sci., 13, № 3, 162 (1966).
11. B. Domeij, K. Bijoqvist. Phys. Letters, 14, № 2, 127 (1965).
12. E. Bogh, E. Uggerhoj. Phys. Letters, 17, № 2, 116 (1965).
13. А. Ф. Туликов. УФН, т. 87, вып. 4, 585, 1965.
14. Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. Изд-во "Мир", Москва, 1963.
15. Г. С. Жданов. Физика твердого тела. Изд. МГУ, М., 1961.
16. Дж. Кэй, Т. Лэби. Таблицы физических и химических постоянных. Физматгиз, М., 1962.
17. А. А. Воробьев. Физические свойства ионных кристаллических диэлектриков, Томск, 1960.
18. M. W. Thompson, R. S. Nielson. Phil. Mag., № 8 94, 1677 (1963).
19. Н. Бор. Прохождение атомных частиц через вещество. Техиздат, Москва, 1957.
20. С. В. Стародубцев, А. М. Романов. Прохождение заряженных частиц через вещество. Изд. АН Уз. ССР, Ташкент, 1962.
21. G. Moliere. Z. Naturforsch, 2a, 133 (1947).
22. Б. И. Сегал, К. А. Семендяев. Пятизначные математические таблицы, ГИМФЛ, М., 1962.
23. I. Lindhard. Phys. Letters, 12, № 2, 126 (1964); Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 34, № 14, (1965).
24. I. B. Sanders, I. M. Flint. Physica, 30, 129 (1964).
25. Дж. Лейбфрид. Макроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. Физматгиз, М., 1963.
26. B. W. Farmery, R. S. Nelson, R. Sizman, M. W. Thompson. Nucl. Instr. and Meth., 38, 231, (1965).
27. А. А. Воробьев, Б. А. Кононов. Прохождение электронов через вещество, Томск, 1966.
28. W. Bethe. Z. Naturforsch, 4a, 88, (1949); 5a, 8, (1950).
29. L. Lindhard, A. Winther. Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 34, №4, (1964).